

(12) NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES  
PATENTWESENS (PCT) VERÖFFENTLICHTE INTERNATIONALE ANMELDUNG

(19) Weltorganisation für geistiges Eigentum  
Internationales Büro



(43) Internationales Veröffentlichungsdatum  
4. September 2003 (04.09.2003)

PCT

(10) Internationale Veröffentlichungsnummer  
WO 03/073464 A1

(51) Internationale Patentklassifikation<sup>7</sup>: H01J 49/42

(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP03/01274

(22) Internationales Anmeldedatum:  
10. Februar 2003 (10.02.2003)

(25) Einreichungssprache: Deutsch

(26) Veröffentlichungssprache: Deutsch

(30) Angaben zur Priorität:  
102 08 626.5 28. Februar 2002 (28.02.2002) DE  
102 08 625.7 28. Februar 2002 (28.02.2002) DE

(81) Bestimmungsstaaten (*national*): AE, AG, AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, BZ, CA, CH, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DZ, EC, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MA, MD, MG, MK, MN, MW, MX, MZ, NO, NZ, OM, PH, PL, PT, RO, RU, SC, SD, SE, SG, SK, SL, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, YU, ZA, ZM, ZW.

(84) Bestimmungsstaaten (*regional*): ARIPO-Patent (GH, GM, KE, LS, MW, MZ, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), eurasisches Patent (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches Patent (AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HU, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE, SI, SK, TR), OAPI-Patent (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

(71) Anmelder (*für alle Bestimmungsstaaten mit Ausnahme von US*): METANOMICS GMBH & CO. KGAA [DE/DE]; Tegeler Weg 33, 10589 Berlin-Charlottenburg (DE).

Veröffentlicht:  
— mit internationalem Recherchenbericht

(72) Erfinder; und

(75) Erfinder/Anmelder (*nur für US*): WALK, Tilmann, B. [DE/DE]; Bismarckstrasse 40, 10627 Berlin (DE).  
DOSTLER, Martin [DE/DE]; Auf der Lichtung 69, 16761 Henningsdorf (DE).

Zur Erklärung der Zweibuchstaben-Codes und der anderen Abkürzungen wird auf die Erklärungen ("Guidance Notes on Codes and Abbreviations") am Anfang jeder regulären Ausgabe der PCT-Gazette verwiesen.

(74) Anwalt: BIEBERBACH, Andreas; c/o BASF Aktiengesellschaft, 67056 Ludwigshafen (DE).

593/00008

021408

(54) Title: MASS SPECTROMETRY METHOD FOR ANALYSING MIXTURES OF SUBSTANCES

(54) Bezeichnung: MASSENSPEKTROMETRISCHES VERFAHREN ZUR ANALYSE VON SUBSTANZGEMISCHEN

(57) **Abstract:** The invention relates to a mass spectrometry method for analysing mixtures of substances using a triple quadrupole mass spectrometer, whereby said mixtures of substances are ionised prior to analysis. The invention is characterised in that the method comprises the following steps: a) selection of a mass/charge quotient ( $m/z$ ) of an ion created by ionisation in a first analytical quadrupole (I) of the mass spectrometer; b) fragmentation of the ion selected in step (a) by applying an acceleration voltage in an additional subsequent quadrupole (II), which is filled with a collision gas and acts as a collision chamber; c) selection of a mass/charge quotient of an ion created by the fragmentation process in step (b) in an additional subsequent quadrupole (III), whereby steps (a) to (c) of the method are carried out at least once; and d) analysis of the mass/charge quotients of all the ions present in the mixture of substances as a result of the ionisation process, whereby the quadrupole (II) is filled with collision gas, but no acceleration voltage is applied during the analysis. Steps (a) to (c) and step (d) can also be carried out in reverse order.

(57) **Zusammenfassung:** Massenspektrometrisches Verfahren zur Analyse von Substanzgemischen mit einem Tripel-Quadrupol-Massenspektrometer, wobei die Substanzgemische vor der Analyse ionisiert wurden, dadurch gekennzeichnet, dass das Verfahren folgende Schritte umfaßt: a) Auswählen eines Masse/Ladungs-Quotienten ( $m/z$ ) eines durch Ionisation entstandenen Ions in einem ersten analytischen Quadrupol (I) des Massenspektrometers, b) Fragmentieren des unter (a) ausgewählten Ions unter Anlegung einer Beschleunigungsspannung in einem weiteren folgenden Quadrupol (II), das mit einem Kollisionsgas gefüllt ist und als Kollisionskammer fungiert, c) Auswählen eines Masse/Ladungs-Quotienten eines durch die Fragmentierung (b) entstandenen Ions in einem weiteren nachfolgenden Quadrupol (III), wobei die Verfahrensschritte (a) bis (c) mindestens einmal durchlaufen werden und d) Analysieren der Masse/Ladungs-Quotienten aller im Substanzgemisch durch die Ionisation vorhandenen Ionen, wobei das Quadrupol (II) mit Kollisionsgas gefüllt ist, jedoch während der Analyse keine Beschleunigungsspannung angelegt ist; wobei die Schritte (a) bis (c) und der Schritt (d) auch in umgekehrter Reihenfolge durchgeführt werden können.

WO 03/073464 A1

11F